

## 8. Integrazione di equazioni differenziali

I sistemi dinamici deterministici a tempo continuo sono basati su equazioni differenziali del primo del primo ordine. Abbiamo visto che se le equazioni sono lineari è sempre possibile scrivere la soluzione in forma analitica. Se sono non lineari ciò è possibile solo nel caso unidimensionale ed in quello bidimensionale qualora sia possibile trovare un integrale primo del moto in modo esplicito. Nel caso multidimensionale solo l'esistenza di integrali primi indipendenti consente di trovare una soluzione analitica del sistema che viene detto integrabile. In generale per trovare una soluzione delle equazioni del moto occorre utilizzare dei metodi di approssimazione che sono sempre basati sulla proprietà di gruppo ossia sulla osservazione che detto  $\Delta t$  un piccolo intervallo temporale e  $t_k = k\Delta t$  l'orbita a questi tempi si può scrivere

$$\mathbf{x}(t_k) = S_{\Delta t}(\mathbf{x}(t_{k-1}))$$

Una soluzione approssimata si ottiene sostituendo alla evoluzione esatta nell'intervallo  $\Delta t$  una evoluzione approssimata che differisce da questa per un resto di ordine  $(\Delta t)^{m+1}$  con  $m \geq 1$ .

$$S_{\Delta t} = M_{\Delta t} + O((\Delta t)^{m+1})$$

dove l'intero  $m$  è l'ordine del metodo di approssimazione. Da un sistema a tempo continuo si passa ad una mappa  $M_{\Delta t}$  che genera un'orbita discreta

$$\mathbf{x}_k = M_{\Delta t}(\mathbf{x}_{k-1})$$

con la stessa condizione iniziale. L'errore al tempo  $t_k$  dato da

$$e_k = \|\mathbf{x}(t_k) - \mathbf{x}_k\|$$

viene detto globale e risulta dalla accumulazione degli errori locali di ordine  $(\Delta t)^{m+1}$  commessi ad ogni passo. La stima dell'errore globale è data da  $e_k \leq C(\Delta t)^m(e^{L t_k} - 1)$  come vedremo più avanti e non è migliorabile se non si fanno ipotesi più specifiche sul campo vettoriale  $\Phi$  a parte quelle di regolarità. Uno schema di approssimazione può introdurre effetti dissipativi oppure risultare instabile se l'orbita diverge per  $k \rightarrow \infty$  mentre l'orbita esatta resta confinata. Questo li rende poco adatti ad approssimare le orbite di sistemi conservativi come quelli Hamiltoniani. Nel seguito svilupperemo dei metodi di approssimazione detti *simplettici* che rispettano i vincoli geometrici e conservano in media gli invarianti, indotti dalle sue simmetrie, consentendo integrazioni su tempi lunghi poiché non presentano né effetti dissipativi né instabilità. Le proprietà dei sistemi hamiltoniani sono richiamate nel capitolo 9 mentre gli schemi di integrazione specifici detti *simplettici* sono sviluppati nel capitolo 10. In questo capitolo Si presentano gli schemi espliciti di Eulero basati sullo sviluppo di Taylor ed alcuni metodi espliciti ed impliciti costruiti a partire dalle formule di quadratura applicate alla equazione integrale.. Tra gli schemi

espliciti rientrano gli schemi di Ruge-Kutta che non fanno intervenire le derivate del campo vettoriale.

## Il metodo di Eulero

È basato sullo sviluppo di Taylor di  $\mathbf{x}(t + \Delta t) - \mathbf{x}(t)$  fino all'ordine  $m$ . La mappa  $M_{\Delta t}$  si ottiene trascurando il resto. A tal fine è conveniente introdurre la derivata di Lie rispetto ad un campo vettoriale  $\Phi(\mathbf{x})$  con è definita da

$$D_{\Phi} = \sum_{j=1}^d \Phi_j \frac{\partial}{\partial x_j}$$

dove  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$  e quindi rappresenta una derivata nella direzione del campo. La serie di Lie è definita da

$$S_t = e^{tD_{\Phi}} \equiv \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k}{k!} D_{\Phi}^k$$

Si possono provare le seguenti proprietà che sono di carattere puramente algebrico e la cui prova formale viene data a prescindere dalla convergenza della serie.

$$\frac{d}{dt} e^{tD_{\Phi}} = e^{tD_{\Phi}} D_{\Phi} \quad e^{tD_{\Phi}} f(\mathbf{x}) = f(e^{tD_{\Phi}} \mathbf{x})$$

La seconda proprietà segue da  $e^{tD_{\Phi}} AB = (e^{tD_{\Phi}} A)(e^{tD_{\Phi}} B)$  Questo implica che data la equazione

$$\frac{d}{dt} \mathbf{x}(t) = \Phi(\mathbf{x}(t))$$

la soluzione con condizioni iniziale  $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0$  si scrive

$$\mathbf{x}(t) = e^{tD_{\Phi}} \mathbf{x}_0$$

e quindi il flusso è dato da  $S_{\Delta t}(\mathbf{x}_0) = S_{\Delta t} \mathbf{x}_0$ . Infatti

$$\frac{d}{dt} (e^{tD_{\Phi}} \mathbf{x}_0) = e^{tD_{\Phi}} D_{\Phi} \mathbf{x}_0 = e^{tD_{\Phi}} \Phi(\mathbf{x}_0) = \Phi(e^{tD_{\Phi}} \mathbf{x}_0)$$

Possiamo esprimere la soluzione come uno sviluppo troncato all'ordine  $m$  più un resto utilizzando lo sviluppo dell'operatore  $e^{tD_{\Phi}}$

$$S_t = \sum_{k=0}^m \frac{t^k}{k!} D_{\Phi}^k + E_m$$

dove il resto è rappresentato da

$$E_m = \frac{1}{m!} \int_0^t (t - t')^m D_{\Phi}^{m+1} e^{t' D_{\Phi}} dt'$$

Infatti integrando per parti si ottiene

$$E_m = \frac{t^{m+1}}{(m+1)!} D_\Phi^{m+1} + E_{m+1}$$

Partendo da  $m = 0$  ed iterando si ottiene la approssimazione ad un ordine finito con il suo resto. Applicando  $R_m$  a  $\mathbf{x}$  ed applicando il teorema della media all'integrale che esprime il resto si ottiene anche la seguente espressione.

$$E_m = \frac{t^{m+1}}{(m+1)!} D_\Phi^{m+1} e^{\tau D_\Phi}$$

Per ottenere uno schema di approssimazione partiamo dallo sviluppo

$$\mathbf{x}(t + \Delta t) - \mathbf{x}(t) = (e^{\Delta t D_\Phi} - 1)\mathbf{x}(t) = \sum_{k=1}^m \frac{(\Delta t)^k}{k!} D_\Phi^k \mathbf{x}(t) + E_m \mathbf{x}(t)$$

e lo riscriviamo nella forma

$$\mathbf{x}(t + \Delta t) - \mathbf{x}(t) = \Delta t \Psi(\mathbf{x}(t)) + E_m$$

Il primo termine ed il resto sono dati da

$$\Psi(\mathbf{x}(t)) = \sum_{k=1}^m \frac{(\Delta t)^k}{k!} D_\Phi^k \mathbf{x}(t) \quad E = \frac{(\Delta t)^{m+1}}{(m+1)!} D_\Phi^{m+1} \mathbf{x}(\tau)$$

dove  $t < \tau < t + \Delta t$ .



**Figura 8.1** Sezione di Poincaré (lato sinistro), integrazione numerica (lato destro).

Lo schema di Eulero di ordine  $m$  è dato dalla ricorrenza ottenuta approssimando  $e^{\Delta t D_\Phi}$  con il suo sviluppo all'ordine  $m$  e trascurando il resto.

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \Delta t \Psi(\mathbf{x}_k)$$

Notiamo che uno schema di integrazione differisce dalla mappa di Poincaré di un sistema periodico perché le successioni di punti che genera sono prossime all'orbita esatta anziché appartenere ad essa, come mostra schematicamente la figura 6.1

Scritti esplicitamente lo schema di ordine 1 è dato da

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \Delta t \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{x}_k)$$

Lo schema di ordine 2 da

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \Delta t \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{x}_k) + \frac{(\Delta t)^2}{2} D_{\boldsymbol{\Phi}} \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{x}_k)$$

dove  $D_{\boldsymbol{\Phi}} \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{x}) = \sum \Phi_j \partial \boldsymbol{\Phi} / \partial x_j$

Gli schemi di Eulero si possono sviluppare anche quando il campo dipende dal tempo esplicitamente. Il metodo precedente si applica se allarghiamo lo spazio delle fasi introducendo una nuova coordinata  $x_0$  ed una nuova equazione  $\dot{x}_0 = 1$  in modo che il nuovo campo non dipenda più da  $t$  esplicitamente. Lo schema di Eulero al primo ordine è al primo ordine

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \Delta t \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{x}_k, t_k)$$

Quello al secondo ordine si ottiene a partire dallo sviluppo di Taylor

$$\begin{aligned} \mathbf{x}(t + \Delta t) - \mathbf{x}(t) &= \Delta t \dot{\mathbf{x}}(t) + \frac{(\Delta t)^2}{2} \ddot{\mathbf{x}}(t) + O((\Delta t)^3) = \\ &= \Delta t \left[ \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{x}(t), t) + \frac{(\Delta t)^2}{2} \left( D_{\boldsymbol{\Phi}} \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{x}(t), t) + \frac{\partial \boldsymbol{\Phi}}{\partial t}(\mathbf{x}(t), t) \right) \right] + O((\Delta t)^2) \end{aligned}$$

ed è espresso da

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \Delta t \left[ \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{x}_k, t_k) + \frac{\Delta t}{2} \left( D_{\boldsymbol{\Phi}} \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{x}_k, t_k) + \frac{\partial \boldsymbol{\Phi}}{\partial t}(\mathbf{x}_k, t_k) \right) \right]$$

## Errore locale ed errore globale

Anche nel caso di sistema non autonomo scriviamo l'evoluzione tra  $t$  e  $t + \Delta t$  tramite lo sviluppo di Taylor fino all'ordine  $m$  con un termine di resto

$$\mathbf{x}(t + \Delta t) - \mathbf{x}(t) = \Delta t \boldsymbol{\Psi}(\mathbf{x}(t), t) + \mathbf{E}(\mathbf{x}(t), t)$$

supponendo che  $\boldsymbol{\Phi}$  sia continua insieme con le sue derivate fino all'ordine  $m + 1$  ne segue che  $\boldsymbol{\Psi}$  è lipschitziana e quindi possiamo scrivere

$$\|\boldsymbol{\Psi}(\mathbf{y}, t) - \boldsymbol{\Psi}(\mathbf{x}, t)\| \leq L \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|, \quad \|\mathbf{E}\| \leq (\Delta t)^{m+1} M$$

Lo schema di integrazione è fornito dalla ricorrenza

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \Delta t \boldsymbol{\Psi}(\mathbf{x}_k, t_k)$$

dove  $t_k = k\Delta t$ . Chiamiamo  $\|\mathbf{E}\|$  l'errore locale mentre l'errore globale è la distanza tra la soluzione approssimata e quella esatta ed è il risultato della accumulazione degli errori locali commessi a ciascun passo.

$$e_k = \|\mathbf{x}(t_k) - \mathbf{x}_k\|$$

**Teorema.** Per uno schema di integrazione di ordine  $m$  ove  $\Psi$  soddisfi la condizione di Lipschitz l'errore globale è limitato da

$$e_k \leq (\Delta t)^m \frac{M}{L} [e^{Lt_k} - 1]$$

*Prova* Prendendo la differenza tra  $\mathbf{x}(t_{k+1})$  valutato per  $t = t_k$  e  $\mathbf{x}_{k+1}$  si ha

$$\|\mathbf{x}(t_{k+1}) - \mathbf{x}_{k+1}\| \leq \|\mathbf{x}(t_k) - \mathbf{x}_k\| + \Delta t \|\Psi(\mathbf{x}(t_k), t_k) - \Psi(\mathbf{x}_k, t_k)\| + \|\mathbf{E}\|$$

L'errore  $e_k$  soddisfa la disuguaglianza

$$e_{k+1} \leq e_k + \Delta t L e_k + M(\Delta t)^{m+1}$$

e, scelto lo stesso punto iniziale  $\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}(0)$  cui corrisponde  $e_0 = 0$ , è maggiorato da  $\bar{e}_k$  che soddisfa la ricorrenza

$$\bar{e}_{k+1} = (1 + \Delta t L) \bar{e}_k + M(\Delta t)^{m+1}$$

inizializzata da  $\bar{e}_0 = 0$ . Infatti  $e_1 \leq M(\Delta t)^{m+1} = \bar{e}_1$  e supposto  $e_k \leq \bar{e}_k$  si ha  $e_{k+1} \leq \bar{e}_k + \Delta t L \bar{e}_k + M(\Delta t)^{m+1} = \bar{e}_{k+1}$  e dunque per induzione la disuguaglianza è vera qualunque sia  $k$ . La parte omogenea della ricorrenza ha come soluzione  $c(1 + L\Delta t)^k$  dove  $c$  è una costante arbitraria e la soluzione si ottiene aggiungendo una soluzione particolare della ricorrenza non omogenea cioè  $-(\Delta t)^m M/L$ . La costante  $c$  è fissata da  $\bar{e}_0 = 0$

$$e_k \leq \bar{e}_k = (\Delta t)^m \frac{M}{L} [(1 + \Delta t L)^k - 1] \leq (\Delta t)^m \frac{M}{L} (e^{Lk\Delta t} - 1)$$

La stima esponenziale non è migliorabile se non si fanno ipotesi più specifiche sulla natura del campo vettoriale. Questa stima è dovuta alla accumulazione degli errori che si amplificano ad ogni iterazione. Nel limite  $L \rightarrow 0$  gli errori semplicemente si sommano ed il risultato è  $e_k \leq k M (\Delta t)^{m+1}$  ma essendo  $L > 0$  si ha l'effetto di amplificazione.

## Motivo della stima esponenziale

Per capire meglio perché, senza ulteriori ipotesi la stima non può essere migliorata, consideriamo due equazioni differenziali il cui campo vettoriale differisce per una piccola quantità

$$\dot{x} = Lx \qquad \dot{y} = Ly + \epsilon$$

Le soluzioni corrispondenti alla stessa condizione iniziale  $x(0) = y(0) = x_0$  sono date da

$$x(t) = x_0 e^{Lt} \qquad y(t) = x_0 e^{Lt} + \frac{\epsilon}{L} (e^{Lt} - 1)$$

Si noti la corrispondenza tra  $y(t) - x(t)$  e la stima dell'errore globale fornita in precedenza. Questo significa che nel caso di una soluzione che diverge esponenzialmente con  $t$  la stima è ottimale. Per sistemi in cui la soluzione è limitata come accade ad esempio se  $\mathbf{x}(t)$  è periodica, la stima ottenuta può sopravvalutare l'errore tanto da renderla di scarsa o nessuna utilità. Per tempi piccoli  $t \ll L^{-1}$  la differenza  $|y(t) - x(t)|$  cresce linearmente con  $t$  come  $\epsilon t$ , ma per tempi grandi la crescita è esponenziale.

Nel caso di una mappa lineare con una piccola perturbazione abbiamo un risultato analogo

$$x_{k+1} = (1 + \Delta t L) x_k \qquad y_{k+1} = (1 + \Delta t L) y_k + \epsilon (\Delta t)^{m+1}$$

Se la condizione iniziale è la stessa  $y_0 = x_0$  si trova

$$x_k = (1 + \Delta t L)^k x_0 \qquad y_k = (1 + \Delta t L)^k x_0 + \frac{\epsilon (\Delta t)^m}{L} ((1 + \Delta t L)^k - 1)$$

Per  $L > 0$  la distanza  $e_k = |y_k - x_k|$  cresce esponenzialmente con  $k$  ossia se la soluzione imperturbata cresce esponenzialmente anche la distanza tra le due soluzioni cresce nello stesso modo

## Metodo di Runge Kutta di ordine due e quattro

I metodi di Eulero richiedono il calcolo delle derivate del campo  $\Phi(\mathbf{x}, t)$  rispetto a  $\mathbf{x}$  e  $t$ . Per evitare questo calcolo, oneroso per gli schemi di ordine elevato poiché va fatto analiticamente, sono stati sviluppati altri schemi detti di Runge-Kutta, che richiedono solo la valutazione del campo.

Lo schema del secondo ordine si basa sulla identità seguente

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{x}, t) &\equiv \frac{1}{2} [\Phi(\mathbf{x}, t) + \Phi(\mathbf{x} + \Delta t \Phi(\mathbf{x}, t), t + \Delta t)] = \\ &= \Phi(\mathbf{x}, t) + \frac{\Delta t}{2} \left[ \frac{\partial \Phi}{\partial x_j}(\mathbf{x}, t) \cdot \Phi_j(\mathbf{x}, t) + \frac{\partial \Phi}{\partial t}(\mathbf{x}, t) \right] + O((\Delta t)^2) \end{aligned}$$

ed il corrispondente algoritmo che definisce lo schema di Runge-Kutta è

$$\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k = \Delta t \left[ \frac{1}{2} \Phi(\mathbf{x}_k, t_k) + \frac{1}{2} \Phi(\mathbf{x}_k + \Delta t \Phi(\mathbf{x}_k, t_k), t_k + \Delta t) \right]$$

e quindi corrisponde ad un metodo di Eulero del secondo ordine a meno dell'errore che è di ordine  $(\Delta t)^2$ .

In generale uno schema di Runge-Kutta si scrive nella forma seguente

$$\Psi = \sum_{j=1}^m A_j \mathbf{K}_j, \quad \mathbf{K}_1 = \Phi(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{K}_j = \Phi(\mathbf{x} + \beta_j \Delta t \mathbf{K}_{j-1}, t + \alpha_j \Delta t), \quad j \geq 2$$

dove i pesi  $A_i$  con  $i \geq 1$  ed i coefficienti  $\alpha_i, \beta_i$  con  $i \geq 2$  si determinano imponendo che l'errore di discretizzazione sia  $(\Delta t)^{m+1}$ .

Per  $m = 2$  si ricavano le seguenti relazioni che

$$A_1 + A_2 = 1, \quad A_2 \alpha_2 = \frac{1}{2} \quad A_2 \beta_2 = \frac{1}{2}$$

che ammettono una famiglia ad un parametro  $\mu$  con  $0 < \mu < 1$  di soluzioni date da  $A_1 = 1 - \mu$ ,  $A_2 = \mu$  e da  $\alpha_2 = (2(1 - \mu))^{-1}$ ,  $\beta_2 = (2\mu)^{-1}$ . Lo schema precedente corrisponde a  $\mu = 1/2$ . Per lo schema del quarto ordine  $m = 4$  occorre risolvere un sistema algebrico la cui soluzione è

$$A_1 = A_4 = \frac{A_2}{2} = \frac{A_3}{2} = \frac{1}{6} \quad \alpha_2 = \beta_2 = \alpha_3 = \beta_3 = \frac{1}{2} \quad \alpha_4 = \beta_4 = 1.$$

Scritto per esteso lo schema di Runge-Kutta del quarto ordine, che è tra i più frequentemente usati per l'integrazione numerica, diventa

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{K}_1 = \Phi(\mathbf{x}_k, t_k) \\ \mathbf{K}_2 = \Phi(\mathbf{x}_k + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{K}_1, t_k + \frac{\Delta t}{2}) \\ \mathbf{K}_3 = \Phi(\mathbf{x}_k + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{K}_2, t_k + \frac{\Delta t}{2}) \\ \mathbf{K}_4 = \Phi(\mathbf{x}_k + \Delta t \mathbf{K}_3, t_k + \Delta t) \\ \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \frac{\Delta t}{6} [\mathbf{K}_1 + 2\mathbf{K}_2 + 2\mathbf{K}_3 + \mathbf{K}_4] \end{array} \right.$$

Poiché l'errore globale è spesso fortemente sovrastimato dalla stima esponenziale, in particolare nel caso di moti periodici o quasiperiodici, una valutazione più attendibile si ottiene se l'equazione ammette un integrale primo. Se  $H(\mathbf{x})$  è l'integrale primo di un sistema autonomo

$$H(\mathbf{x}_k) = H(\mathbf{x}(t_k)) + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x}(t_k)) \cdot \mathbf{e}_k + O(e_k^2) = H(\mathbf{x}_0) + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x}(t_k)) \cdot \mathbf{e}_k + O(e_k^2)$$

dove  $\mathbf{e}_k = \mathbf{x}_k - \mathbf{x}(t_k)$ . La variazione  $|H(\mathbf{x}_k) - H(\mathbf{x}_0)|$  dell'integrale primo fornisce la proiezione dell'errore sulla normale alla superficie  $H(\mathbf{x}) = E$ , dopo aver diviso per  $\|\partial H / \partial \mathbf{x}\|$  fintanto che esso si mantiene sufficientemente piccolo da poter trascurare  $O(e_k^2)$ .

## Metodi basati su formule di quadratura

Metodi di approssimazione si ottengono partendo dalla equazione integrale che corrisponde alla equazione differenziale  $d\mathbf{x}/dt = \Phi(\mathbf{x}, t)$ .

$$\mathbf{x}(t + \Delta t) = \mathbf{x}(t) + \int_t^{t+\Delta t} \Phi(\mathbf{x}(t'), t') dt'$$

Se approssimiamo l'integrale con il metodo dei rettangoli valutando la funzione integranda all'estremo inferiore otteniamo il metodo di Eulero.

### Metodo di Eulero implicito

Se approssimiamo l'integrale valutando la funzione integranda all'estremo superiore, otteniamo il metodo di Eulero implicito

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \Delta t \Phi(\mathbf{x}_{k+1})$$

La equazione implicita si risolve con un metodo iterativo per la ricerca del punto fisso. Per  $\Delta t$  abbastanza piccolo si ha convergenza lineare. Usando il metodo di Newton la convergenza è quadratica.

### Metodo di Heun

Per avere un metodo del secondo ordine approssimiamo l'integrale con il metodo dei trapezi

$$\mathbf{x}(t + \Delta t) = \mathbf{x}(t) + \frac{\Delta t}{2} [\Phi(\mathbf{x}(t), t) + \Phi(\mathbf{x}(t + \Delta t), t + \Delta t)] + O(\Delta t)^3$$

da cui segue l'algoritmo

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \frac{\Delta t}{2} [\Phi(\mathbf{x}_k, t_k) + \Phi(\mathbf{x}_{k+1}, t_{k+1})]$$

che viene detto metodo di Heun oppure di Crank-Nicolson. Possiamo rendere il metodo esplicito valutando  $\mathbf{x}_{k+1}$  sul lato destro tramite il metodo di Eulero del primo ordine ottenendo in tal modo un algoritmo che coincide con il Runge-Kutta di ordine 2.

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \frac{\Delta t}{2} [\Phi(\mathbf{x}_k, t_k) + \Phi(\mathbf{x}_k + \Delta t \Phi(\mathbf{x}_k), t_{k+1})]$$

Un metodo di ordine 4 implicito si ottiene applicando la formula di quadratura di Simpson.

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_{k-1} + \frac{\Delta t}{3} [\Phi(\mathbf{x}_{k-1}, t_{k-1}) + 4\Phi(\mathbf{x}_k, t_k) + \Phi(\mathbf{x}_{k+1}, t_{k+1})]$$

La ricorrenza inizia con  $k = 1$  e  $\mathbf{x}_1$  va calcolato tramite un metodo del terzo ordine partendo da  $\mathbf{x}_0$ .



## Metodo midpoint

Valutiamo la equazione integrale calcolando l'integrale tra  $t$  e  $t + \Delta t$  utilizzando il metodo del punto medio e uno sviluppo di Taylor

$$\begin{aligned}\mathbf{x}(t + \Delta t) &= \mathbf{x}(t) + \int_t^{t+\Delta t} \Phi(\mathbf{x}(t')) dt' = \mathbf{x}(t) + \Delta t \Phi\left(\mathbf{x}\left(\frac{t + \Delta t}{2}\right)\right) + O((\Delta t)^3) = \\ &= \mathbf{x}(t) + \Delta t \Phi\left(\frac{\mathbf{x}(t) + \mathbf{x}(t + \Delta t)}{2}\right) + O((\Delta t)^3)\end{aligned}$$

Lo schema midpoint implicito è dato da

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \Delta t \Phi\left(\frac{\mathbf{x}_k + \mathbf{x}_{k+1}}{2}\right)$$

Uno schema esplicito sempre di ordine 2 si trova usando il primo passo iterativo che corrisponde ad avere Eulro come predictor per  $\mathbf{x}_{k+1}$  sul lato destro. Lo schema midpoint esplicito è dato

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \Delta t \Phi\left(\mathbf{x}_k + \frac{\Delta t}{2} \Phi(\mathbf{x}_k)\right)$$

e richiede due valutazioni del campo  $\Phi$  ad ogni passo come il Runge-Kutta del secondo ordine.

## Metodo di Simpson

Se valutiamo la equazione integrale tra  $t - \Delta t$  e  $t + \Delta t$  usando il metodo di Simpson otteniamo il seguente schema implicito

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_{k-1} + \frac{\Delta t}{3} (\Phi(\mathbf{x}_{k-1}) + 4\Phi(\mathbf{x}_k) + \Phi(\mathbf{x}_{k+1}))$$

Poiché l'errore  $(\Delta t)^5$  il metodo risulta del quarto ordine ma per essere inizializzato occorre valutare  $\mathbf{x}_1$  con la stessa accuratezza, ottenibile ad esempio con un Runge-Kutta. Anziché risolvere iterativamente l'equazione implicita si può usare un predittore per valutare  $\mathbf{x}_{k+1}$  sul lato destro. Se si integra l'equazione integrale tra  $t - 3\Delta t$  e  $t + \Delta t$  utilizzando la interpolazione di Legendre su 4 punti ai tempi  $t - j\Delta t$  con  $j = 0, 1, 2, 3$  si ottiene un predittore ancora del quarto ordine che insieme con il correttore scritto sopra è noto come metodo di Milne-Simpson.

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_{k-3} + \frac{4\Delta t}{3} (2\Phi(\mathbf{x}_{k-2}) - \Phi(\mathbf{x}_{k-1}) + 2\Phi(\mathbf{x}_k))$$

Per la inizializzazione occorrono  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3$  che vanno sempre calcolati con un metodo esplicito del quarto ordine come Runge-Kutta.

## Metodi espliciti

Quelli basati su una interpolazione lineare ai tempi  $t, t - \Delta t, \dots, t - p\Delta t$  e sono noti come metodi di Adams-Bashforth. Nel caso della interpolazione a due tempi  $t, t - \Delta t$  la formula di quadratura diventa

$$\int_t^{t+\Delta t} f(t') dt' = \int_t^{t+\Delta t} \left[ f(t) + \frac{f(t) - f(t - \Delta t)}{\Delta t} (t' - t) \right] dt' + E = \frac{\Delta t}{2} [3f(t) - f(t - \Delta t)] + E$$

dove l'errore  $E$  è stimato da

$$|E| \leq \frac{M}{2} \int_t^{t+\Delta t} (t' - t)(t' - t + \Delta t) dt' = \frac{5}{12} M (\Delta t)^3$$

Quindi il metodo esplicito

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \frac{\Delta t}{2} [3\Phi(\mathbf{x}_k) - \Phi(\mathbf{x}_{k-1})]$$

risulta essere di ordine 2. Il metodo di ordine 3 ottenuto interpolando su 3 tempi  $t, t - \Delta t, t - 2\Delta t$  si scrive

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \frac{\Delta t}{12} [23\Phi(\mathbf{x}_k) - 16\Phi(\mathbf{x}_{k-1}) + 5\Phi(\mathbf{x}_{k-2})]$$

## Confronto degli integratori per l'oscillatore

Per un sistema lineare si può confrontare il risultato esatto quello fornito dai vari metodi di quadratura. Infatti per l'equazione  $d\mathbf{x}/dt = \mathbf{A}\mathbf{x}$  la soluzione è data da  $\mathbf{x}(t) = e^{\mathbf{A}t} \mathbf{x}_0$  e quindi dallo sviluppo di Taylor

$$\mathbf{x}(t + \Delta t) = \mathbf{B} \mathbf{x}(t) + E_m \quad \mathbf{B} = \mathbf{I} + \sum_{j=1}^m \frac{(\Delta t)^j}{j!} \mathbf{A}^j$$

Gli schemi espliciti di Eulero o di Runge Kutta, ottenuti trascurando il resto, sono dati da

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{B} \mathbf{x}_k$$

L'errore è espresso da

$$e_k = \|(e^{\mathbf{A}t_k} - \mathbf{B}^k) \mathbf{x}_0\|$$

dove  $t_k = k \Delta t$ . Valutiamo l'errore al primo ordine  $m = 1$  per cui  $\mathbf{B} = \mathbf{I} + \mathbf{A} \Delta t$  quando  $e^{\mathbf{A}t}$  è una matrice di rotazione.

Scriviamo le equazioni del moto per l'oscillatore nella forma seguente

$$\begin{cases} \dot{x} = \omega p \\ \dot{p} = -\omega x \end{cases}$$

## Metodo di Eulero esplicito

Lo schema di Eulero al primo ordine per l'oscillatore è dato da

$$\begin{cases} x_{k+1} = x_k + \omega \Delta t p_k \\ \dot{p}_{k+1} = p_k - \omega \Delta t x_k \end{cases}$$

Introducendo le matrici  $\mathbf{A}$  e  $\mathbf{B}$  definite da

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & \omega \\ -\omega & 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{B} = \mathbf{I} + \mathbf{A} \Delta t = \begin{pmatrix} 1 & \omega \Delta t \\ -\omega \Delta t & 1 \end{pmatrix}$$

ed il vettore  $\mathbf{x} = (x, p)$  la equazione esatta e lo schema di Eulero si scrivono

$$\frac{d}{dt} \mathbf{x}(t) = \mathbf{A} \mathbf{x}(t) \quad \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{B} \mathbf{x}_k$$

Le corrispondenti soluzioni  $\mathbf{x}(t) = e^{\mathbf{A}t} \mathbf{x}_0$  e  $\mathbf{x}_k = \mathbf{B}^k \mathbf{x}_0$  si ottengono diagonalizzando le matrici  $\mathbf{A}$  e  $\mathbf{B}$ .

Gli autovalori di  $\mathbf{A}$  sono  $\pm i\omega$  e quelli di  $e^{\mathbf{A}t}$  sono  $e^{\pm i\omega t}$ . La matrice  $\mathbf{U}$  degli autovettori di  $\mathbf{A}$  e la sua inversa sono e la matrice  $\Lambda$  degli autovalori sono

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -i & i \end{pmatrix} \quad \mathbf{U}^{-1} = \frac{1}{2i} \begin{pmatrix} i & -1 \\ i & 1 \end{pmatrix} \quad \Lambda = \begin{pmatrix} -i\omega & 0 \\ 0 & i\omega \end{pmatrix}$$

e quindi si ha

$$e^{\mathbf{A}t} = \mathbf{U} e^{\Lambda t} \mathbf{U}^{-1} = \mathbf{R}(\omega t) \equiv \begin{pmatrix} \cos(\omega t) & \sin(\omega t) \\ \sin(\omega t) & -\cos(\omega t) \end{pmatrix}$$

Gli autovalori di  $\mathbf{B}$  sono dati da

$$\lambda = 1 \pm i\omega \Delta t = e^{\mu} e^{\pm i\alpha} \quad \alpha = \arctan(\omega \Delta t) \quad \mu = \frac{1}{2} \log(1 + (\omega \Delta t)^2)$$

La matrice degli autovettori di  $\mathbf{B}$  e di  $\mathbf{A}$  sono identiche e quindi

$$\mathbf{B}^k = e^{k\mu} \mathbf{U} \begin{pmatrix} e^{-ik\alpha} & 0 \\ 0 & e^{ik\alpha} \end{pmatrix} \mathbf{U}^{-1} = e^{k\mu} \mathbf{R}(k\alpha)$$

L'errore introdotto dal metodo di Eulero cresce esponenzialmente  $e_k \sim e^{k\mu} \sim e^{\omega^2 t \Delta t / 2}$ . Se  $\omega = 2\pi/T$  dove  $T$  è il periodo e  $\Delta t = T/N$ , dopo  $n$  periodi l'errore è  $e_n \sim e^{2\pi^2 n / N}$ . Dopo un solo periodo con  $N = 100$  l'errore è già del 20%.

## Metodo di Eulero implicito

Un'altra approssimazione è data dal metodo di Eulero implicito che si scrive che l'equazione lineare considerata diventa

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n + \Delta t \mathbf{A} \mathbf{x}_{n+1}$$

la cui soluzione esplicita è

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{B}^{-1} \mathbf{x}_n \quad \mathbf{B} = \mathbf{I} - \Delta t \mathbf{A}$$

dove  $\mathbf{A}$  è stata definita sopra. È evidente che  $e^{\Delta t \mathbf{A}} = (\mathbf{I} - \Delta t \mathbf{A})^{-1} + O((\Delta t)^2)$  e quindi l'ordine di approssimazione è lo stesso che Eulero esplicito. Tuttavia in questo caso si ha che

$$\mathbf{x}_k = \mathbf{B}^k \mathbf{x}_0 = e^{-k\mu} \mathbf{R}(k\alpha) \mathbf{x}_0$$

Quindi per  $k \rightarrow \infty$  la soluzione tende a zero. L'effetto è lo stesso di una dissipazione introdotta nella equazione dell'oscillatore. Come vedremo nel capitolo successivo esistono integratori che non sono né instabili né dissipativi. Si tratta degli integratori symplettici. Integratori con questa proprietà per l'oscillatore sono dati dai metodi impliciti come quello di Heun che viene descritto nel seguito di questo capitolo.

## Metodo di Heun

La ricorrenza per il metodo implicito di Heun, ricavato dalla equazione integrale approssimata con il metodo dei trapezi, è la stessa che per il metodo mid-point, poiché la equazione è lineare, ed è data da

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \frac{\Delta t}{2} (\mathbf{A} \mathbf{x}_k + \mathbf{A} \mathbf{x}_{k+1})$$

Quindi la soluzione si scrive

$$\mathbf{x}_{k+1} = (1 - \mathbf{A} \Delta t / 2)^{-1} (1 + \mathbf{A} \Delta t / 2) \mathbf{x}_k \equiv \mathbf{B} \mathbf{x}_k$$

Si tratta di una ricorrenza lineare la cui matrice ha determinante 1 come si verifica facilmente. Quindi i suoi autovalori sono  $e^{\pm i\alpha}$  per cui è coniugata ad una rotazione da una trasformazione lineare. Il metodo è stabile e non dissipativo. Le orbite  $\mathbf{x}_k$  appartengono a ellissi. Ponendo  $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{B} \mathbf{x}_k$  il calcolo esplicito fornisce

$$\mathbf{B} = \frac{1}{1 + \omega^2 (\Delta t)^2 / 4} \begin{pmatrix} 1 - \omega^2 \Delta t^2 / 4 & \omega t \\ -\omega t & 1 - \omega^2 (\Delta t)^2 / 4 \end{pmatrix}$$

Gli autovalori sono soluzione della equazione

$$\lambda^2 + \text{Tr} \mathbf{A} \lambda + 1 = 0 \quad \text{Tr} \mathbf{A} = 2 \frac{1 - \omega^2 (\Delta t)^2 / 4}{1 + \omega^2 (\Delta t)^2 / 4}$$

Gli autovalori sono  $\lambda = e^{\pm i\alpha}$  dove

$$\cos \alpha = \frac{1 - \omega^2 (\Delta t)^2 / 4}{1 + \omega^2 (\Delta t)^2 / 4} \quad \longrightarrow \quad \tan \frac{\alpha}{2} = \frac{\omega \Delta t}{2}$$

Allo stesso risultato si giunge più empiricamente osservando che la trasformazione  $U$  che diagonalizza  $A$  è la stessa che diagonalizza  $B$ . Quindi gli autovalori di  $B$  risultano dati da  $(1 + i\omega \Delta t/2)/(1 - i\omega \Delta t/2) = e^{i\alpha}$  e dal suo complesso coniugato  $e^{-i\alpha}$  dove  $\alpha$  è lo stesso sopra indicato. Ne segue che detta  $B = U \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha} \end{pmatrix} U^{-1} = R(\alpha)$  da cui  $\mathbf{x}_k = R(k\alpha)\mathbf{x}_0$ .

## Metodo di Eulero o Runge Kutta 2

Per l'oscillatore armonico abbiamo visto che il metodo di Eulero è instabile. Esaminiamo ora la stabilità del metodo di Runge-Kutta del secondo e quarto ordine i cui risultati sono identici a quelli del metodo di Eulero. Scriviamo dunque la ricorrenza per Eulero o Runge Kutta di ordine  $m$

$$\mathbf{x}(t) = e^{At} \mathbf{x}_0 \quad \mathbf{x}_{k+1} = B\mathbf{x}_k \quad B = e^{A\Delta t} + O((\omega\Delta t)^{m+1})$$

La matrice  $B$  all'ordine  $m$  si ottiene dallo sviluppo di Taylor di  $e^{A\Delta t} = R(\omega\Delta t)$  e quindi delle funzioni  $\cos(\omega\Delta t)$  e  $\sin(\omega\Delta t)$  fino all'ordine  $m$  in  $\Delta t$ . Ai primi due ordini si ha

$$m=1 \quad B = \begin{pmatrix} 1 & \omega\Delta t \\ -\omega\Delta t & 1 \end{pmatrix} \quad m=2 \quad B = \begin{pmatrix} 1 - \frac{1}{2}(\omega\Delta t)^2 & \omega\Delta t \\ -\omega\Delta t & 1 - \frac{1}{2}(\omega\Delta t)^2 \end{pmatrix}$$

Al primo ordine  $m=1$  abbiamo già visto che  $\det B = 1 + (\omega\Delta t)^2 > 1$  e che gli autovalori  $1 \pm i\omega\Delta t$  hanno modulo maggiore di 1.

Per  $m=2$  si ha  $\det B = 1 + (\omega\Delta t)^4/4 > 1$  e gli autovalori  $\lambda = 1 - (\omega\Delta t)^2/2 \pm i\omega\Delta t$  hanno ancora modulo maggiore di 1. La divergenza è esponenziale ma più lenta rispetto allo schema del primo ordine. In entrambi i casi  $\|\mathbf{x}_k\| = e^{k\eta} \|\mathbf{x}_0\|$  ma per lo schema del primo ordine  $\eta = (\omega\Delta t)^2/2$  per lo schema del secondo ordine  $\eta = (\omega\Delta t)^4/8$ .

## Metodo di Runge-Kutta 4

Al quarto ordine  $m=4$  si ha

$$B = \begin{pmatrix} C & S \\ -S & C \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 1 - \frac{1}{2}(\omega\Delta t)^2 + \frac{1}{24}(\omega\Delta t)^4 & \omega\Delta t - \frac{1}{6}(\omega\Delta t)^3 \\ -\omega\Delta t + \frac{1}{6}(\omega\Delta t)^3 & 1 - \frac{1}{2}(\omega\Delta t)^2 + \frac{1}{24}(\omega\Delta t)^4 \end{pmatrix}$$

Ci limitiamo a calcolare il determinante che vale

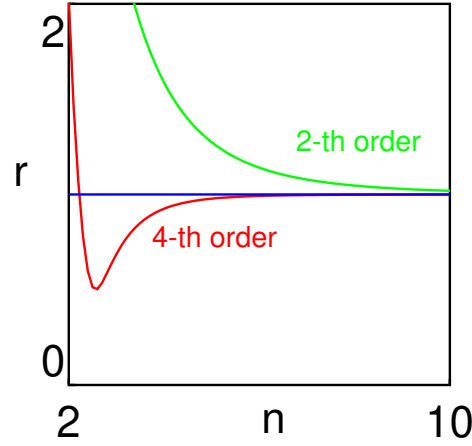
$$\det B = C^2 + S^2 = 1 - \frac{(\omega\Delta t)^6}{72} \left( 1 - \frac{(\omega\Delta t)^2}{8} \right)$$

La matrice  $B$  ha sempre autovalori complessi coniugati dati da

$$\lambda = C \pm iS = e^{-\mu} e^{\pm i\alpha}$$

ed il loro modulo

$$r = e^{-\mu} = \sqrt{\det B}$$



**Figura 8.2** Andamento del fattore  $r$ , di contrazione quando risulta minore di 1, in funzione del numero di passi  $n=T/\Delta t$  per periodo per gli schemi di Runge Kutta di ordine 2 e 4. All'ordine 4 per  $n=2.56$  si ha la massima contrazione con  $r=1/2$ .

definisce il fattore di contrazione. La mappa è contrattiva se  $r < 1$ , condizione verificata se  $\omega\Delta t < 2\sqrt{2}$  perché  $\det \mathbf{B} < 1$ . La mappa è espansiva e quindi l'integratore è instabile se  $r > 1$  e tale condizione si verifica se  $\omega\Delta t > 2\sqrt{2}$ .

Il minimo valore di  $r$ , che corrisponde alla massima rapidità di contrazione, è raggiunto per  $\omega\Delta t = \sqrt{6}$  quando è massimo  $(\omega\Delta t)^6 - (\omega\Delta t)^8/8$  ed in tal caso da  $\det \mathbf{B} = 1/4$  si ottiene  $r = 1/2$ . Detto  $T = 2\pi/\Delta t$  il periodo

$$\frac{T}{\Delta t} = \frac{2\pi}{\sqrt{6}} \simeq 2.56 \quad \|\mathbf{x}_k\| \sim \frac{1}{2^k} \|\mathbf{x}_0\| \quad \text{massima contrazione}$$

La mappa risulta instabile  $r > 1$  se

$$\frac{T}{\Delta t} < \frac{\pi}{\sqrt{2}} \simeq 2.22 \quad \text{instabilità}$$

Quando si sceglie  $\Delta t \sim T/2.56$  la rapidità di contrazione è massima e in media ad ogni iterazione la distanza dall'origine si dimezza; dopo 10 passi la distanza si riduce a  $10^{-3}$  volte quella iniziale. Questo fatto può essere utilizzato per realizzare i vincoli di un sistema utilizzando molle rigide. La scelta di  $\Delta t$  va fatta in modo da risolvere bene le altre oscillazioni presenti, mentre le oscillazioni rapide della molla rigida non vengono risolte. Le molle rigide con oscillazioni non risolte dopo pochi passi raggiungono la loro lunghezza di equilibrio. In questo modo si realizzano quasi istantaneamente i vincoli. Risolvere la molla rigida richiede un passo molto piccolo ed è del tutto inutile perché le sue rapide oscillazioni sono irrilevanti, anzi un effetto indesiderato nel processo di realizzazione del vincolo. Questo metodo può essere usato per descrivere il moto di catene come quelle di polipeptidi che costituiscono le proteine.

Osserviamo che per un metodo di Eulero o Runge-Kutta di ordine  $n$  la matrice ha sempre la forma

$$B = \begin{pmatrix} C & S \\ -S & C \end{pmatrix}$$

dove  $C$  e  $S$  sono lo sviluppo di Taylor in  $\tau = \omega\Delta t$  troncato all'ordine  $n$ . Gli autovalori sono dati da

$$\lambda = C \pm iS = r e^{\pm i\alpha}$$

dove

$$\tan \alpha = \frac{S}{C} \quad r = \sqrt{C^2 + S^2}$$

Per gli integratori del primo e secondo ordine l'errore fase è di ordine  $\tau^2$  mentre per il terzo e quarto ordine l'errore è di ordine  $\tau^4$ . In generale se scriviamo

$$\tan \alpha = \tan \tau (1 + O(\tau^m))$$

l'errore in fase si determina osservando che

ordine $n = 1$	$S = s(1 + O(\tau^2))$	$C = c(1 + O(\tau^2))$
ordine $n = 2$	$S = s(1 + O(\tau^2))$	$C = c(1 + O(\tau^4))$
ordine $n = 3$	$S = s(1 + O(\tau^4))$	$C = c(1 + O(\tau^4))$
ordine $n = 4$	$S = s(1 + O(\tau^4))$	$C = c(1 + O(\tau^6))$

e quindi all'ordine  $n = 2m - 1$  e  $n = 2m$  si ha un errore in fase  $\tau^{2m}$ .

Per quanto riguarda la stabilità degli integratori si ha  $r^2 = 1 + \tau^2$  al primo ordine,  $r^2 = 1 + \tau^4/4$  al secondo ordine,  $r^2 = 1 - \tau^4/12(1 - \tau^2/3)$  al terzo ordine e quindi il primo e secondo sono sempre instabili, il terzo è stabile per  $\tau < \sqrt{3}$  mentre il quarto è stabile per  $\tau < 2\sqrt{2}$ . Al terzo ordine la rapidità di contrazione è massima per  $\tau = \sqrt{2}$  e si ha  $r = 2\sqrt{2}/3$  da confrontarsi con  $r = 1/2$  del quarto ordine. Quindi l'errore in ampiezza all'ordine  $n = 2m$  e  $n = 2m + 1$  è  $\tau^{2m+2}$ .

## Appendice: composizione di metodi del secondo ordine

Mostriamo che componendo tre volte il Runge-Kutta del secondo ordine si può ottenere un metodo del terzo ordine. I passi temporali risultano gli stessi che nel caso symplettico, per il quale la prova è del tutto analoga. Data l'equazione differenziale

$$\frac{dx}{dt} = \Phi(x) \quad x \in \mathbb{R}^d$$

il Runge Kutta di ordine due con passo  $\alpha\Delta t$  è definito da

$$x_\alpha = R_\alpha x \equiv x + \frac{\alpha\Delta t}{2} [\Phi(x) + \Phi(x + \alpha\Delta t \Phi(x))]$$

La dimostrazione vale per  $d \geq 1$ . La notazione usata è appropriata per  $d = 1$ . Lo schema è dato da

$$x_\alpha = x + \alpha\Delta t \Phi + \frac{\alpha^2\Delta t^2}{2} \Phi_x \Phi + \frac{\alpha^3\Delta t^3}{4} \Phi_{xx} \Phi^2 + O((\Delta t)^4)$$

Quando in  $\Phi$  o nelle sue derivate non si scrive l'argomento si intende che questo sia  $x$  cioè  $\Phi \equiv \Phi(x)$ ,  $\Phi_x \equiv \Phi_x(x)$ , ...

**Proposizione** La composizione di tre Runge kutta del secondo ordine con passi temporali  $\alpha\Delta t$ ,  $-\beta\Delta t$  e  $\alpha\Delta t$  dove  $2\alpha - \beta = 1$  fornisce uno schema del terzo ordine se vale la condizione

$$2\alpha^3 = \beta^3$$

ossia

$$R_\alpha R_{-\beta} R_\alpha x = x + \Delta t \Phi + \frac{\Delta t^2}{2} \Phi_x \Phi + \frac{\Delta t^3}{6} (\Phi_{xx} \Phi^2 + \Phi_x^2 \Phi) + O((\Delta t)^4)$$

La condizione è la stessa che per il caso symplettico e si ha dunque

$$\alpha = \frac{1}{2 - 2^{1/3}} \quad \beta = \frac{2^{1/3}}{2 - 2^{1/3}}$$

Se, come accade nel caso symplettico, l'errore dà contributo solo agli ordini dispari, per ragioni di simmetria,  $R_\alpha x = x(\alpha\Delta t) + C_3(\Delta t)^3 + C_5(\Delta t)^5 + \dots$ , allora la precedente condizione assicura che lo schema sia del quarto ordine.

*Prova*

Consideriamo dapprima

$$x_{\alpha-\beta} = R_{-\beta} R_\alpha x = x + \Delta t (\alpha - \beta) \Phi + \frac{(\Delta t)^2}{2} (\alpha - \beta)^2 \Phi_x \Phi +$$



$$+ \frac{(\Delta t)^3}{4} (\alpha^3 - \beta^3 + 2\alpha\beta^2 - 2\beta\alpha^2) \Phi_{xx} \Phi^2 + \frac{(\Delta t)^3}{2} (\alpha\beta^2 - \beta\alpha^2) \Phi_x^2 \Phi + O((\Delta t)^4)$$

Si vede subito che imponendo l'uguaglianza dei coefficienti di  $\Phi_x^2 \Phi$  e di  $\Phi_{xx} \Phi^2$  si ottiene  $\alpha^3 = \beta^3$  che implica  $\alpha = \beta$  incompatibile con  $\alpha - \beta = 1$ . La sola soluzione possibile corrisponde alla identità, ossia  $\Delta t = 0$ .

$$\begin{aligned} x_{2\alpha-\beta} &= R_\alpha R_{-\beta} R_\alpha x = x + (2\alpha - \beta)\Delta t \Phi + \frac{(\Delta t)^2}{2} (2\alpha - \beta)^2 \Phi_x \Phi + \\ &+ \frac{(\Delta t)^3}{4} \left( \alpha^3 - \beta^3 + 2\alpha\beta^2 - 2\beta\alpha^2 + \alpha^3 + 2\alpha^2(\alpha - \beta) + 2\alpha(\alpha - \beta)^2 \right) \Phi_{xx} \Phi^2 + \\ &\frac{(\Delta t)^3}{2} \left( \alpha\beta^2 - \beta\alpha^2 + \alpha^2(\alpha - \beta) + \alpha(\alpha - \beta)^2 \right) \Phi_x^2 \Phi + O((\Delta t)^4) \end{aligned}$$

Imponendo che i coefficienti di  $\Phi_{xx} \Phi^2$  e di  $\Phi_x^2 \Phi$  siano uguali si trova che

$$2\alpha^3 = \beta^3$$

che va soddisfatta insieme con  $2\alpha - \beta = 1$  da cui segue

$$\alpha = \frac{1}{2 - 2^{1/3}}$$

Occorre tuttavia verificare che i coefficienti siano uguali a  $1/6$  perché lo schema sia di ordine 3. Tenendo conto che  $\beta = 2\alpha - 1$  e che  $\alpha - \beta = 1 - \alpha$  il coefficiente di  $\Phi_x^2 \Phi$  è dato da

$$\begin{aligned} &\frac{(\Delta t)^3}{2} \left( \alpha\beta^2 - \beta\alpha^2 + \alpha(\alpha - \beta)^2 + \alpha^2(\alpha - \beta) \right) = \\ &= \frac{(\Delta t)^3}{2} \left( \alpha(2\alpha - 1)^2 - \alpha^2(2\alpha - 1) + \alpha(1 - \alpha)^2 + \alpha^2(1 - \alpha) \right) = (\Delta t)^3 \alpha(\alpha - 1)^2 \end{aligned}$$

Perché lo schema sia di ordine 3 occorre verificare che  $\alpha(1 - \alpha)^2 = 1/6$ . Infatti si ha

$$\alpha(\alpha - 1)^2 = \frac{(2^{1/3} - 1)^2}{(2 - 2^{1/3})^3} = \frac{1}{6}$$